

## MODELACIÓN COMPUTACIONAL DEL CAMBIO DE FASE EUTECTOIDE DE UNA FUNDICIÓN DE GRAFITO ESFEROIDAL

Fernando D. Carazo<sup>a</sup>, Patricia M. Dardati<sup>a</sup>, Diego J. Celentano<sup>b</sup> y Luis A. Godoy<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Dpto. Ingeniería Mecánica y CIII, Facultad Regional Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional, Maestro M. López s/n, Ciudad Universitaria, Córdoba, Argentina, <http://www.frc.utn.edu.ar>

<sup>b</sup>Dpto. Ingeniería Mecánica y Metalúrgica, Pontificia Universidad Católica de Chile, Avda., Vicuña Mackena 4860, Macul, Santiago, Chile, <http://www.puc.cl>

<sup>c</sup>Dpto. Estructuras, Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales, Universidad Nacional de Córdoba, Avda. Vélez Sarsfield 1601, Córdoba, Argentina, <http://www.efn.unc.edu.ar>

**Keywords:** fundición nodular, eutectoide, ferrita, perlita, elemento finito.

**Abstract.** En este trabajo se comparan los resultados obtenidos de la simulación numérica del enfriamiento de una fundición de grafito esférico de composición eutéctica según diferentes modelos de la transformación eutectoide estable y metaestable. El cambio de fase eutectoide estable se simula aplicando tres modelos: el primero considera la difusión del carbono desde la austenita hacia los nódulos de grafito y hacia la austenita no transformada, asumiendo que en la interfase ferrita/grafito ocurre una reacción interfacial, y en la interfase ferrita/austenita equilibrio, el segundo modelo no contempla la reacción interfacial en la interfase ferrita/grafito, en su lugar considera que la concentración de carbono en dicha interfase es la de equilibrio; finalmente, el tercer modelo sólo contempla la difusión de los átomos de carbono desde la austenita hacia los nódulos de grafito. Para el estudio de la transformación eutectoide metaestable, se busca determinar la influencia que en el modelado de dicha transformación tiene la ley de nucleación de la perlita; para esto se proponen tres leyes de nucleación: una instantánea función de la velocidad de enfriamiento, una continua función del sobreenfriamiento y, finalmente, una ley continua del tipo exponencial. La ecuación de energía, planteada a nivel de escala macroscópica, se resuelve mediante el método de los elementos finitos y el acoplamiento térmico-microestructural se realiza por el método del calor latente. Por último, se discuten las diferencias y se identifican ventajas y dificultades de cada modelo.

## 1 INTRODUCCIÓN

Las fundiciones de hierro son aleaciones ternarias Fe-C-Si con contenidos de carbono mayores a 2.1% y cantidades de Si entre un 1% y un 3%. En la actualidad, una de las fundiciones de hierro de mayor uso en la industria son las fundiciones de grafito nodular (representan entre un 20% y un 30% de las fundiciones de hierro producidas en la industria metalúrgica). Su nombre se debe a la morfología característica del grafito de forma esférica; estas aleaciones se caracterizan por su gran ductilidad, sus excelentes propiedades mecánicas y su buena respuesta a los tratamientos térmicos, lo cual ha sido motivo para que piezas de acero fundido y forjado sean reemplazadas por piezas de fundición de grafito nodular.

En la [Figura 1](#) se muestra la microestructura típica de la fundición de grafito nodular. En ésta se ven los nódulos de grafito rodeados por una capa de ferrita formando el característico “ojo de buey”; el resto de la matriz es perlita. Esta microestructura es el resultado de la transformación difusional de la austenita en: ferrita y grafito, ferrita y cementita (perlita) o en ambas fases. La evolución microestructural durante los cambios de fase juega un rol determinante en las propiedades mecánicas finales de la pieza. Para el caso de la fundición nodular, las principales características a tener en cuenta son: el tamaño y la distribución de los nódulos de grafito, las fracciones de ferrita y de perlita, el tamaño y distribución de las colonias de perlita y el espaciamiento interlaminar de las colonias de perlita ([Angus 1976](#); [Lacaze et al. 1998](#); [Catalina et al. 2000](#) y [Venugopalan 1990](#)). En este contexto, es necesario comprender y modelar correctamente los fenómenos involucrados en los dos cambios de fase que se desarrollan desde la colada de la aleación hasta alcanzar la temperatura ambiente.

Con el advenimiento de las nuevas computadoras y junto con ellas mayor poder de cálculo, los métodos computacionales han recibido especial atención para el estudio de la evolución microestructural que una pieza fundida experimenta desde su colada hasta alcanzar la temperatura ambiente. La principal ventaja de estos métodos, es la de permitir predecir cuantitativa y cualitativamente las propiedades y características térmicas, mecánicas y microestructurales de las piezas obtenidas a partir de estos procesos. Estas predicciones se basan en modelos matemáticos que acoplan, ya sea en forma secuencial ó paralela, las leyes de la transferencia de masa y calor formuladas a escala macroscópica, con modelos microestructurales que, planteados a escala microscópica, permiten incorporar la cinética de los cambios de fase, imposibles de considerar con modelos formulados solamente a escala macroscópica.

La mayoría de los trabajos dedicados al estudio de las transformaciones de fase de la fundición de hierro nodular, se dedican al estudio de la solidificación, siendo menor la cantidad de trabajos dedicados al estudio de los cambios de fase en estado sólido, y dentro de éstos, la mayoría está dedicado a procesos isotérmicos y no a casos de enfriamiento continuo. A continuación se hace una breve reseña de la modelización del cambio de fase eutectoide de la fundición de grafito esferoidal.

[Venugopalan \(1990\)](#) estudia la transformación de la austenita en ferrita y grafito para una serie de procesos isotérmicos, considerando equilibrio en las interfases ferrita/grafito y ferrita/austenita; asumiendo que la ferrita nuclea instantáneamente sobre los nódulos de grafito cuando se alcanza un período de incubación asociado a las limitaciones en la cinética de la nucleación. A partir de ese instante, todos los nódulos de grafito son rodeados de manera instantánea por una envoltura de ferrita, siendo su espesor el que le corresponde a una fracción volumétrica igual al 1%. El crecimiento de la ferrita y del grafito se produce por la difusión de los átomos de carbono desde la interfase ferrita/austenita hacia los nódulos de grafito y hacia la austenita no transformada, y se calcula a partir del balance de masa que se plantea en la

interfase ferrita/grafito y ferrita/austenita.

Chang et al. (1999) estudian el cambio de fase eutectoide estable en la fundición de grafito esferoidal durante un proceso isotérmico, considerando que la nucleación de la ferrita ocurre instantáneamente a una temperatura calculada a partir de las mediciones y grabaciones obtenidas de un análisis térmico diferencial llevado a cabo. Para el crecimiento del grafito consideran una fórmula aproximada de balance de masa en la interfaz ferrita/grafito.

Lacaze et al. (1998) estudian la transformación eutectoide estable y metaestable de una fundición de grafito esferoidal de composición eutéctica considerando ambos cambios de fase como dos procesos competitivos, y comparando resultados experimentales y numéricos. Estos autores no simulan la solidificación de la aleación, determinando la densidad de nódulos de grafito y el tamaño del elemento representativo de volumen a partir de leyes empíricas obtenidas de mediciones experimentales. El crecimiento de los nódulos de grafito en el interior de la envoltura de ferrita es controlado por una reacción interfacial. La velocidad de crecimiento de la ferrita la obtienen planteando el balance de masa en la interfase ferrita/austenita, considerando en el análisis la difusión del carbono hacia los nódulos de grafito. Al crecimiento de los nódulos de grafito lo calculan planteando el balance de masa en la interfase ferrita/grafito. A la nucleación de las colonias de perlita la modelan como un proceso continuo proporcional al sobreenfriamiento, a la velocidad de enfriamiento y a la densidad de nódulos de grafito, cesando cuando la densidad de colonias de perlita alcanza la densidad de nódulos de grafito. Para las colonias de perlita, y para sobreenfriamientos de hasta 100 °C, proponen una velocidad de crecimiento de las colonias de perlita proporcional al cubo del sobreenfriamiento.

Wessén et al. (1996) estudian la transformación de la austenita en ferrita y grafito para una fundición de grafito esferoidal de composición eutéctica, considerando dicho cambio de fase como un proceso que ocurre en tres pasos en serie. En un primer paso consideran la formación de las envolturas de ferrita alrededor de los nódulos de grafito que es controlada por la difusión del carbono en la austenita primaria. La ferrita nuclea 20°C por debajo de la temperatura eutectoide estable considerando constante su espesor hasta que los nódulos de grafito no han sido envueltos en forma completa por la capa de ferrita; en un segundo paso el crecimiento de la esferas de ferrita está controlado por una reacción interfacial en la interfase ferrita/grafito que depende de la inversa del radio del nódulo de grafito. Finalmente, consideran el crecimiento de la esfera de ferrita como un proceso controlado por la difusión del carbono.

El objetivo de este trabajo es estudiar la influencia que tiene la consideración de algunas de las principales características de los cambios de fase eutectoide estable y metaestable en el modelado de dichas transformaciones. En la sección 2 se presentan las diferentes leyes que se emplean en las simulaciones, mientras que en la sección 3 se comparan y analizan las curvas de enfriamiento y las fracciones de fase obtenidas en la simulación. Por último, las conclusiones que se desprenden de este trabajo se elaboran en la sección 4.

## 2 MODELOS MICROESTRUCTURALES

En este trabajo, el modelado de la solidificación y de los cambios de fases eutectoide se realizan acoplado en forma secuencial un modelo macroestructural que resuelve la ecuación de energía por el método de los elementos finitos (Celentano et al. 1994), con un modelo microestructural que describe la cinética de los cambios de fase eutéctico (Dardati, 2005; Dardati et al., 2006), y eutectoide estable y metaestable.

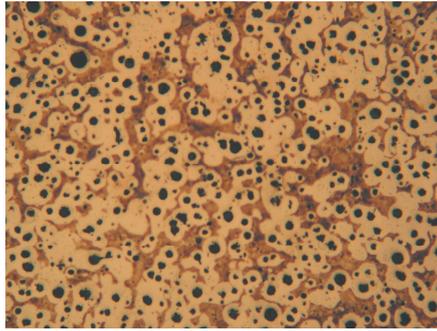


Figura 1: Microestructura típica de las fundiciones de grafito nodular, en ésta pueden verse los nódulos de grafito envueltos por la ferrita, el resto de la matriz es perlita.

## 2.1 Transformación eutéctica

El modelo de solidificación implementado está basado en la teoría plurinodular. La nucleación del grafito se modela como un proceso continuo que comienza cuando la temperatura de la aleación desciende por debajo de la temperatura eutéctica. La nucleación se detiene si se produce recalcancia y se reanuda si la temperatura toma un valor menor a la menor temperatura alcanzada desde el comienzo del proceso y aún no ha finalizado la solidificación. El modelo permite conocer el número de nódulos de grafito y la distribución de sus radios. La nucleación de la austenita es instantánea y ocurre cuando la temperatura alcanza el valor eutéctico; el tamaño del grano final de dicha fase queda determinado por el número de granos de austenita que nuclean. Tanto el crecimiento de los nódulos de grafito como el de la austenita dendrítica se modelan como procesos basados en la difusión del carbono. Una explicación detallada del modelo de transformación eutéctica puede verse en [Dardati \(2005\)](#) y [Dardati et al. \(2006\)](#).

## 2.2 Transformación eutectoide

Aún cuando los trabajos dedicados al estudio de la transformación eutectoide en la fundición nodular son muchos, pocos presentan una descripción cuantitativa de las cantidades finales de fase. En este trabajo, los modelos de la transformación eutectoide consideran a dicho cambio de fase como un proceso competitivo entre la transformación eutectoide estable (austenita/ferrita+grafito), y la metaestable (austenita/ferrita+cementita) ([Guo et al., 1997](#); [Lacaze et al., 1998](#)).

### 2.2.1 Transformación eutectoide estable

Cuando una fundición de grafito esferoidal de composición eutéctica alcanza una temperatura menor a la eutectoide estable, la austenita transforma, según un sistema estable Fe-C, en ferrita y grafito, nucleando sobre los nódulos de grafito, en tanto su crecimiento se produce por la difusión del carbono desde la austenita hacia los nódulos de grafito a través de las esferas de ferrita. El carbono expulsado de la austenita no sólo difunde hacia los nódulos de grafito, sino que también lo hace hacia el volumen de la austenita más alejada de la ferrita ([Lacaze et al., 1998](#), [Venugopalan 1990](#)); esto se debe a que la concentración de carbono en la austenita en contacto con la ferrita es mayor que en el volumen de la austenita alejada de la interfase ferrita/austenita (esto puede verse en la [Figura 2](#)). Durante esta transformación, el tamaño de los nódulos de grafito aumenta debido a la incorporación de los átomos de carbono a los nódulos ya existentes. La fuerza impulsora para la difusión del carbono durante el

crecimiento de la ferrita está dada por la diferencia entre las concentraciones de carbono en la ferrita en la interfase austenita/ferrita y en la interfase ferrita/grafito, como puede verse en la [Figura 2](#).

Las líneas representativas de las concentraciones de carbono de equilibrio para una temperatura menor a la eutectoide estable  $T^*$  se indican en líneas de trazos en el diagrama Fe-C de la [Figura 2](#); en la misma figura se muestra el esquema de una celda eutectoide unitaria parcialmente transformada y el perfil de concentración de carbono de equilibrio para las diferentes fases.

En este trabajo no se ha simulado la nucleación de la ferrita, en su lugar se considera que al alcanzar la temperatura eutectoide estable, y de forma instantánea, cada nódulo de grafito es rodeado por una capa de ferrita con un radio 1% mayor al radio del nódulo de grafito respectivo.

En esta sección se comparan los resultados de tres modelos de transformación eutectoide estable. El estudio se realiza modificando la ley de crecimiento de la ferrita y del grafito, mientras se mantienen iguales las leyes de nucleación y crecimiento de la perlita.

*a) Primer Modelo:*

Se considera que el crecimiento de la ferrita se produce por la difusión del carbono contenido en la austenita hacia los nódulos de grafito y hacia la austenita más alejada de la ferrita, la cual tiene una concentración de carbono menor a la de equilibrio. Planteando equilibrio de masa en la interfase ferrita/austenita y, observando la [Figura 2](#), obtenemos:

$$\rho^\alpha (C^{\gamma/\alpha} - C^{\alpha/\gamma}) \frac{dR_\alpha}{dt} = \rho^\alpha D_C^\alpha \left. \frac{\partial C^\alpha}{\partial r} \right|_{r=R_\alpha} - \rho^\lambda D_C^\gamma \left. \frac{\partial C^\gamma}{\partial r} \right|_{r=R_\alpha} \quad (1)$$

donde:  $\rho^\alpha$  y  $\rho^\gamma$  son las densidades de la ferrita y de la austenita respectivamente,  $D_C^\alpha$  y  $D_C^\gamma$  son los coeficientes de difusión del carbono en la ferrita y en la austenita respectivamente,  $C^\alpha$  y  $C^\gamma$  son los perfiles de concentración de carbono en la ferrita y en la austenita respectivamente,  $C^{\gamma/\alpha}$  y  $C^{\alpha/\gamma}$  son las concentraciones de carbono de equilibrio en la austenita y en la ferrita en la interfase ferrita/austenita respectivamente y  $R_\alpha$  es el radio de la envoltura de ferrita que rodea al nódulo de grafito.

Por otro lado, la velocidad de crecimiento de los nódulos de grafito es función del flujo de átomos de carbono que difunde desde la interfase ferrita/austenita hacia los nódulos. Planteando equilibrio de masa en la interfase ferrita/grafito, obtenemos:

$$\rho^{gr} (100 - C^i) \frac{dR_{gr}}{dt} = \rho^\alpha D_C^\alpha \left. \frac{\partial C^\alpha}{\partial r} \right|_{r=R_\alpha} \quad (2)$$

donde:  $\rho^{gr}$  es la densidad del grafito,  $C^i$  es la concentración de carbono en la ferrita en la interfase ferrita/grafito y  $R_{gr}$  es el radio del nódulo de grafito.

Para calcular los gradientes de concentración de carbono involucrados en las ecuaciones (1) y (2), se resuelve la segunda ley de Fick considerando que la difusión del carbono a través de la ferrita se lleva a cabo como un proceso estacionario, obteniendo un perfil de concentración de carbono en la ferrita con simetría esférica de la forma:

$$C^\alpha = a + \frac{b}{r} \quad (3)$$

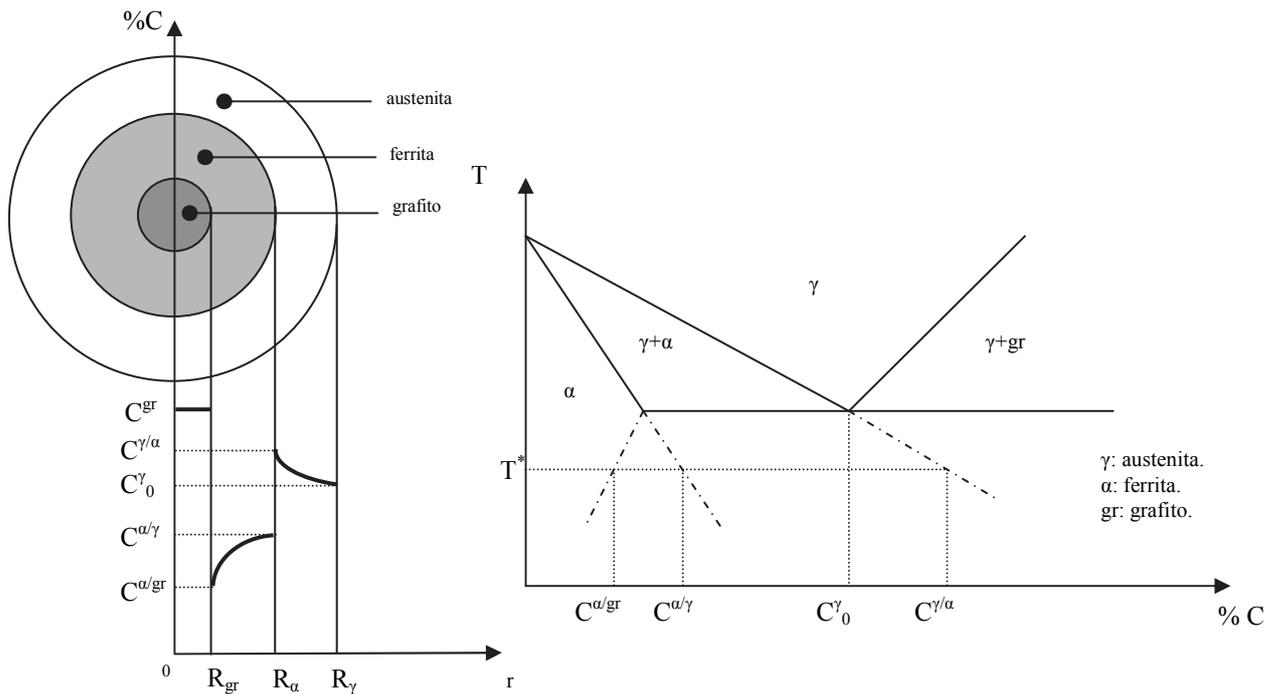


Figure 2: Esquema de una región del diagrama Fe-C, donde se ven las composiciones de interés para una temperatura  $T^* < T_{\text{estable}}$ , y del ERV con el perfil de concentración de carbono.

Las constantes  $a$  y  $b$  se calculan a partir de las concentraciones de carbono de equilibrio en las interfases ferrita/grafito y ferrita/austenita, siendo los gradientes de concentración de carbono en la interfase ferrita/grafito y ferrita/austenita:

$$\left. \frac{\partial C^\alpha}{\partial r} \right|_{r=R_{gr}} = \frac{(C^{\alpha/\gamma} - C^i) R_\alpha}{R_{gr} (R_\alpha - R_{gr})} \quad (4)$$

$$\left. \frac{\partial C^\alpha}{\partial r} \right|_{r=R_\alpha} = \frac{(C^{\alpha/\gamma} - C^i) R_{gr}}{R_\alpha (R_\alpha - R_{gr})} \quad (5)$$

El gradiente de concentración de carbono en la austenita en la interfase ferrita/austenita, está dado por:

$$\left. \frac{\partial C^\gamma}{\partial r} \right|_{r=R_\alpha} = \frac{(C^{\gamma_0} - C^{\gamma/\alpha})}{R_\alpha} \quad (6)$$

donde:  $C^{\gamma_0}$  y  $C^{\gamma/\alpha}$  son las concentraciones de carbono de equilibrio en la austenita alejada de la ferrita y en la interfase ferrita/austenita respectivamente.

Considerando el crecimiento de los nódulos de grafito controlado por una reacción interfacial en la interfase ferrita/grafito y, asumiendo que en la interfase ferrita/austenita existe equilibrio, la diferencia  $(C^{\alpha/\gamma} - C^i)$  presente en las ecuaciones (4) y (5), representa la diferencia de la concentración de carbono que provee la fuerza impulsora necesaria para que los átomos de carbono difundan desde la interfase ferrita/austenita hacia la interfase ferrita/grafito. Siguiendo el razonamiento propuesto por Lacaze et al. (1998), consideramos

que el flujo de átomos de carbono dado por el primer miembro de la ecuación (2), se lleva a cabo en dos pasos en serie.

En el primer paso, se considera que el flujo de carbono es controlado por una reacción interfacial en la interfase ferrita/grafito dada por la siguiente expresión:

$$\phi = -K^\alpha \rho^\alpha (C^i - C^{\alpha/gr})^2 \quad (7)$$

siendo  $K^\alpha$  una constante característica de la reacción interfacial.

En el segundo paso, la transferencia de los átomos de carbono está controlada por un proceso difusivo, donde el flujo de átomos de carbono está dado por:

$$\phi = \rho^\alpha D_C^\alpha \left. \frac{\partial C^\alpha}{\partial r} \right|_{r=R_{gr}} \quad (8)$$

Reemplazando (4) en (8), igualando el valor resultante con (7) y despejando finalmente  $C^i$ , se obtiene:

$$C^i = -\frac{D_C^\alpha}{2rK^\alpha} + \sqrt{\left(\frac{D_C^\alpha}{2rK^\alpha}\right)^2 + \left(\frac{D_C^\alpha}{2rK^\alpha}\right)^2 (C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr}) + C^{\alpha/gr}} \quad (9)$$

donde:  $\bar{r} = R_\alpha / R_{gr} (R_\alpha - R_{gr})$ .

La velocidad de crecimiento de los nódulos de grafito es:

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = D_C^\alpha \frac{\rho^\alpha}{\rho^{gr}} \frac{(C^{\alpha/\gamma} - C^i)}{(100 - C^i)} \frac{1}{\bar{r}} \quad (10)$$

donde:  $\bar{r}' = R_{gr} / R_\alpha (R_\alpha - R_{gr})$ .

Finalmente, reemplazando los valores de los gradientes de concentración de carbono (4) y (5) en (1), podemos despejar la velocidad de crecimiento de la ferrita, resultando:

$$\frac{dR_\alpha}{dt} = \frac{D_C^\alpha}{\bar{r}} \frac{(C^{\alpha/\gamma} - C^i)}{(C^{\gamma/\alpha} - C^{\alpha/\gamma})} - \frac{\rho^\gamma}{\rho^\alpha} D_C^\gamma \frac{1}{R_\alpha} \frac{(C^{\gamma_0} - C^{\gamma/\alpha})}{(C^{\gamma/\alpha} - C^{\alpha/\gamma})} \quad (11)$$

#### b) Segundo Modelo:

Se considera que existe equilibrio en ambas interfases de la ferrita, ferrita/grafito y ferrita/austenita; a igualdad de las demás condiciones, la velocidad de crecimiento de los nódulos de grafito y de la envoltura de ferrita es:

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = D_C^\alpha \frac{\rho^\alpha}{\rho^{gr}} \frac{(C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr})}{(100 - C^{\alpha/gr})} \frac{R_\alpha}{R_{gr} (R_\alpha - R_{gr})} \quad (12)$$

$$\frac{dR_\alpha}{dt} = \frac{D_C^\alpha}{\bar{r}} \frac{(C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr})}{(C^{\gamma/\alpha} - C^{\alpha/\gamma})} - \frac{\rho^\gamma}{\rho^\alpha} D_C^\gamma \frac{1}{R_\alpha} \frac{(C^{\gamma_0} - C^{\gamma/\alpha})}{(C^{\gamma/\alpha} - C^{\alpha/\gamma})} \quad (13)$$

La diferencia entre el primer modelo y el segundo modelo, es la concentración de carbono en la ferrita en contacto con el grafito; en el primer modelo dicha concentración es controlada por la reacción interfacial (8), mientras que en el segundo modelo es la de equilibrio (Figura 2).

c) *Tercer Modelo:*

Sólo se considera el flujo de átomos de carbono que difunde desde la interfase ferrita/austenita hacia los nódulos de grafito, y no se tiene en cuenta ni la redistribución de carbono en la austenita, ni la reacción interfacial en la interfase ferrita/grafito. En este caso las velocidades de crecimiento de la ferrita y el grafito son:

$$\frac{dR_{gr}}{dt} = D_C^\alpha \frac{\rho^\alpha}{\rho^{gr}} \frac{(C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr})}{(100 - C^{\alpha/gr})} \frac{R_\alpha}{R_{gr}(R_\alpha - R_{gr})} \quad (14)$$

$$\frac{dR_\alpha}{dt} = \frac{D_C^\alpha}{r} \frac{(C^{\alpha/\gamma} - C^{\alpha/gr})}{(C^{\gamma/\alpha} - C^{\alpha/\gamma})} \quad (15)$$

## 2.2.2 Transformación eutectoide metaestable

Cuando se alcanza la temperatura eutectoide metaestable, las colonias de perlita comienzan a nuclear y crecer. En este trabajo se asume que las colonias de perlita son de forma esférica y que nuclean en el volumen de la austenita no transformada.

### 2.2.2.1 Nucleación de la perlita

Se proponen tres leyes de nucleación de las colonias de perlita a los fines de estudiar su influencia en la cinética de la transformación y en el proceso de enfriamiento. En los cálculos realizados con cada uno de los modelos de nucleación se mantienen las mismas leyes de crecimiento de la ferrita y de la perlita.

a) *Primer modelo:*

La nucleación de las colonias de perlita se considera instantánea y en función de la velocidad de enfriamiento:

$$N_p = A_p \frac{dT}{dt} \quad (16)$$

siendo:  $N_p$  la densidad de colonias de perlita,  $A_p$  un coeficiente cuyo valor debe ser obtenido experimentalmente para una fundición determinada.

b) *Segundo modelo:*

Se considera que la nucleación ocurre como un proceso continuo a partir de que la aleación alcanza la temperatura eutectoide metaestable según la siguiente expresión función del sobreenfriamiento y de la velocidad de enfriamiento (Lacaze et al., 1998):

$$\frac{dN_p}{dt} = A_p' (N_0 - N_p) (1 - f_\gamma) (\Delta T_p)^m \frac{dT}{dt} \quad (17)$$

siendo:  $N_p$  la densidad de colonias de perlita,  $N_0$  la densidad máxima de colonias de perlita determinada experimentalmente,  $A_p'$  y  $m$  coeficientes que se determinan experimentalmente,  $\Delta T_p$  el sobreenfriamiento con respecto a la temperatura eutectoide metaestable,  $(1 - f_\gamma)$  un factor que tiene en cuenta la disminución de los sitios de nucleación a medida que la fracción de austenita ( $f_\gamma$ ) disminuye. Con el fin de que la comparación numérica de los diferentes modelos de nucleación sea válida, se adopta un  $N_0$  igual al que resulta del modelo de nucleación instantánea. Se supone que la nucleación de colonias de perlita cesa cuando la

densidad de colonias de perlita alcanza el valor de la densidad máxima de colonias de perlita determinadas a partir de la ley de nucleación instantánea.

c) *Tercer modelo:*

La densidad de colonias de perlita se calcula considerando una relación entre  $N$  y  $\Delta T_p$  del tipo exponencial. Siguiendo el razonamiento propuesto por Varma et al. (2001), la dependencia exponencial del número de colonias de perlita con el sobreenfriamiento se expresa como:

$$N_p = a \exp(b\Delta T_p) \quad (18)$$

derivando (19) y multiplicando por  $(1 - f_\gamma)$ , la velocidad de nucleación es:

$$\frac{dN_p}{dt} = c \exp(b\Delta T_p)(1 - f_\gamma) \frac{dT}{dt} \quad (19)$$

los coeficientes,  $a$  y  $b$  se determinan experimentalmente. La ecuación (19) es una ley de nucleación empírica basada en datos experimentales. Para poder extraer conclusiones de la comparación de los modelos de nucleación se asume que la nucleación de colonias de perlita cesa cuando la densidad de colonias de perlita alcanza el valor de la densidad máxima de colonias de perlita determinado a partir de (17).

### 2.2.2.2 Crecimiento de la perlita

La fórmula utilizada para calcular la velocidad de crecimiento de las colonias de perlita se basa en la teoría de Zener-Hillert para el crecimiento de dicha fase en los aceros al carbono (Hillert, 1957). Utilizando este modelo para un proceso de difusión de carbono en el volumen de austenita y suponiendo que las colonias de perlita son de forma esférica, la velocidad de crecimiento del radio de las colonias de perlita es (Varma et al., 2001):

$$\frac{dR_p}{dt} = c_p \exp(-Q_v / RT)(1 - f_\gamma)(\Delta T_p)^m \quad (20)$$

donde:  $c_p$  es un coeficiente que depende de la composición de la aleación,  $\exp(-Q_v / RT)$  es un factor proporcional a la movilidad de la interfase perlita/austenita, siendo:  $Q_v$  la energía de activación en la interfase perlita/austenita para la difusión del carbono,  $R$  la constante universal de los gases y  $T$  la temperatura absoluta de la aleación,  $\Delta T_p$  es el sobreenfriamiento con respecto a la temperatura eutécticoide metaestable y  $m$  es un parámetro que caracteriza el tipo de proceso que controla la difusión del carbono.

## 3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para las simulaciones se considera un conjunto pieza-molde con elementos cuadriláteros de cuatro nodos, dos para el molde y dos para la pieza (Figura 3). Además, se emplea un elemento de contacto para simular el flujo de calor entre la pieza y el molde y un elemento de superficie para representar la extracción de calor por convección en la superficie del molde en contacto con el aire. En la Tabla 1 y en la Tabla 2 se indican los valores de los datos utilizados en los cálculos para el molde y la fundición respectivamente.

Las concentraciones de carbono de equilibrio se calculan con las siguientes fórmulas (Lacaze et al. 1998):

$$C^{\gamma/\alpha} = 0.1876 - 4.112 \cdot 10^{-4} T + 2.26 \cdot 10^{-7} T^2 + 0.125 Si$$

$$C^{\alpha/\gamma} = 6.7 \cdot 10^{-4} - 5.10 \cdot 10^{-10} T^2 + 2.8 \cdot 10^{-7} T + (1.2 \cdot 10^{-8} T^2 - 4.5 \cdot 10^{-3}) Si$$

$$\Delta C = (2.9 \cdot 10^{-6} - 2.8 \cdot 10^{-5} Si)$$

$$C^{\alpha/gr} = C^{\alpha/\gamma} - \Delta C$$

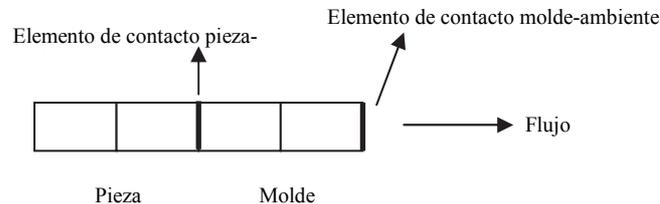


Figura 3: Esquema de la pieza utilizada en las simulaciones.

Las temperaturas de transformación eutectoide estable y metaestable se calculan a partir de las siguientes expresiones (Lacaze et al. 1998):

$$T_{\alpha} (^{\circ}C) = 739 + 1840Si + 20000Si^2$$

$$T_{p} (^{\circ}C) = 727 + 2160Si + 230Si^2$$

Finalmente, los valores de los coeficientes de difusión del carbono en la ferrita y la austenita fueron extraídos de Agren (1982), y son:

$$D_C^{\gamma} (m^2 / s) = 2.343 \cdot 10^{-5} \exp(-17767 / T)$$

$$D_C^{\alpha} (m^2 / s) = 2.0 \cdot 10^{-6} \exp(-10115 / T) \exp \left\{ 0.5898 \left[ 1 + \frac{2}{\pi} \tan^{-1} (15629 / T_C - 15309 / T) \right] \right\}$$

$$T_C (K) = 1043 - 1000Si$$

En todos los casos las concentraciones de  $Si$  deben estar expresadas en porcentaje en peso. En cada una de las Figuras 4-9 se muestran dos gráficos, a la izquierda se muestra la curva de enfriamiento y evolución de fracciones de fase desde la temperatura de colada hasta completar la transformación eutectoide estable y metaestable, y a la derecha la evolución de las fracciones de ferrita y perlita.

### 3.1 Simulación del proceso de enfriamiento con diferentes modelos de crecimiento de la ferrita

La Figura 4 corresponde al modelo de cambio de fase eutectoide estable considerado como un proceso controlado por la difusión del carbono a través de las esferas de ferrita hacia los nódulos de grafito, siendo las concentraciones de carbono en las interfases ferrita/grafito y ferrita/austenita las de equilibrio; en la Figura 5, se muestran las curvas correspondientes al modelo del cambio de fase eutectoide estable en el cual se considera la difusión del carbono hacia la austenita no transformada; finalmente, en la Figura 6 se muestran los resultados obtenidos al modelar el cambio de fase eutectoide estable como un proceso controlado por la difusión del carbono a través de las envolturas de ferrita hacia los nódulos de grafito y hacia la austenita no transformada, considerando, además, una reacción interfacial en la ferrita en la interfase ferrita/grafito la cual modifica la concentración de carbono de equilibrio en dicha interfase.

Cabe aclarar que para los tres modelos se mantiene la misma ley de nucleación y de crecimiento de la perlita, esto a los efectos de que los resultados obtenidos al variar la ley de crecimiento de la ferrita sean comparables.

De la comparación de las fracciones de los dos primeros casos, Figura 4 y Figura 5, se ve que cuando se considera la difusión del carbono hacia los nódulos de grafito y hacia la

austenita no transformada, la fracción de ferrita es mayor que cuando se considera solamente la difusión del carbono hacia los nódulos de grafito. Esto se debe a que el empobrecimiento en carbono de la austenita en la interfase ferrita/austenita es mayor en el segundo caso, lo cual favorece el crecimiento de la ferrita. Al comparar la Figura 6 con la Figura 4 y Figura 5, se observa que la reacción interfacial ralentiza la transformación eutéctode estable, siendo la fracción de ferrita considerablemente menor en la Figura 6 que en la Figura 4 y la Figura 5, favoreciendo así la transformación eutéctode metaestable al haber considerado ambos cambios de fase como competitivos. En todos los casos se observa una pendiente pronunciada al inicio de la transformación eutéctode estable, lo cual puede deberse a la no consideración de la nucleación de la ferrita, como así también a una elevada densidad de nódulos de grafito obtenida al final de la solidificación, el cual aumenta la velocidad de crecimiento de la ferrita.

T [°C]	Calor específico [kJ/kg °C]
744.4	27
828.4	77
892.9	127
946.1	177
992.3	227
1033.9	277
1238.8	573
Densidad [kg/m <sup>3</sup> ]: 1700	
Conductividad [W/m°C]: 1.2	

Tabla 1: Propiedades de la arena.

Calor específico [kJ/kg °C]			
T [°C]	C.esp.	T [°C]	C.esp.
777	704.3	1200	915
1130	747.2	1300	915
Densidad [kg/m <sup>3</sup> ]: 7000			
Conductividad [W/m°C]: 42			
Calor latente eutéctico [kJ/kg]: 230			
Coeficiente de difusión del C [m <sup>2</sup> /s]: $D_c^l = 5.0 \times 10^{-10}$ $D_c^g = 9.0 \times 10^{-11}$ (solidificación)			
Parámetros de nucleación grafito: $b = 4.0 \times 10^{13}$ [n°grano/m <sup>3</sup> °C s] $c = 340$ [°C]			
Parámetro de nucleación austenita [n° gr s/m <sup>3</sup> °C]: $A = 1.0 \times 10^7$			
Coeficiente de Gibbs-Thompson [°K m]: $\Gamma = 2.0 \times 10^{-7}$			
Densidad ferrita/ densidad grafito: 3.46			
Calor latente eutéctode [kJ/kg]: 60			
Coeficiente reacción interfacial [K/m]: $K^\alpha = 4.0 \times 10^{-2}$			
Coeficiente nucleación perlita (instantánea) [n° gr s/m <sup>3</sup> °C]: $A_p = 3.03 \times 10^{13}$			
Coeficiente nucleación perlita (continua) [1/m <sup>3</sup> K <sup>4</sup> ]: $A_p' = 1.0 \times 10^{-1}$			
Coeficiente nucleación perlita (continua): $c = 8.1 \times 10^{12}$			
Coeficiente nucleación perlita (continua): $b = 9.0 \times 10^{-5}$			
Coeficiente termodinámico crecimiento perlita: $c_p = 1.03 \times 10^{-3}$			
Energía de activación crecimiento perlita [J]: 125000			

Tabla 2: Propiedades de la fundición.

En los cálculos realizados con los tres modelos, la variación de la fracción de grafito es muy pequeña, esto se corresponde con lo reportado por Lacaze et al. (1998), Wessén et al. (1996) y Venugopalan (1990).

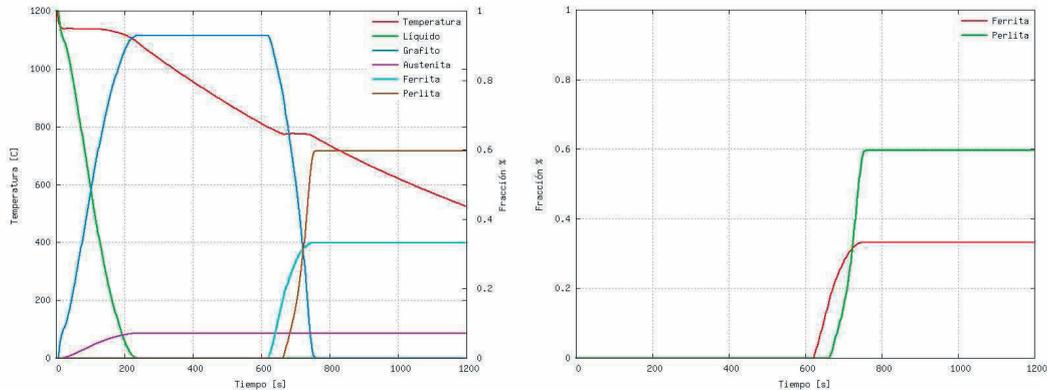


Figura 4: Curva de enfriamiento y fracciones de fase para el primer modelo de crecimiento de la ferrita.

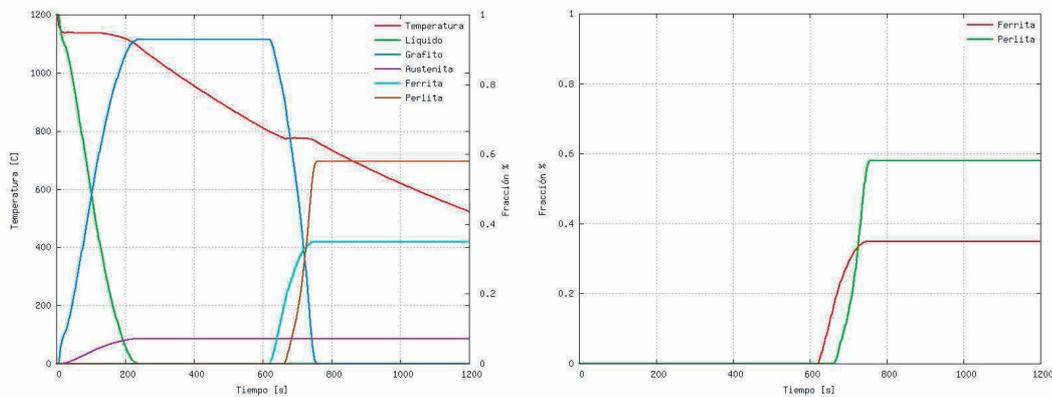


Figura 5: Curva de enfriamiento y fracciones de fase para el segundo modelo de crecimiento de la ferrita.

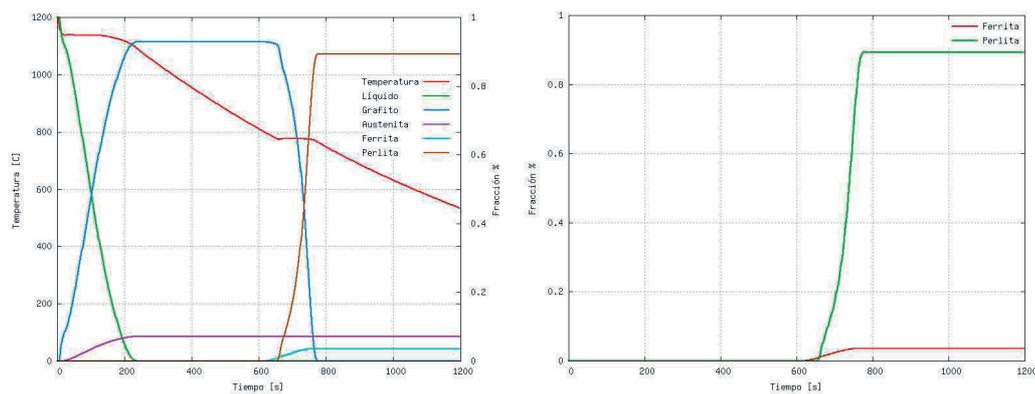


Figura 6: Curva de enfriamiento y fracciones de fase para el tercer modelo de crecimiento de la ferrita.

### 3.2 Simulación del proceso de enfriamiento con diferentes leyes de nucleación de la perlita

En la Figura 7 se muestran los gráficos obtenidos al modelar la nucleación de las colonias de perlita como un proceso instantáneo; en la Figura 8 se muestran los gráficos obtenidos al modelar la nucleación de las colonias de perlita como un proceso continuo en función del sobreenfriamiento y de la velocidad de enfriamiento; finalmente, en la Figura 9 las curvas corresponden al caso en que la nucleación de las colonias de perlita se considera como un

proceso continuo según una ley del tipo exponencial.

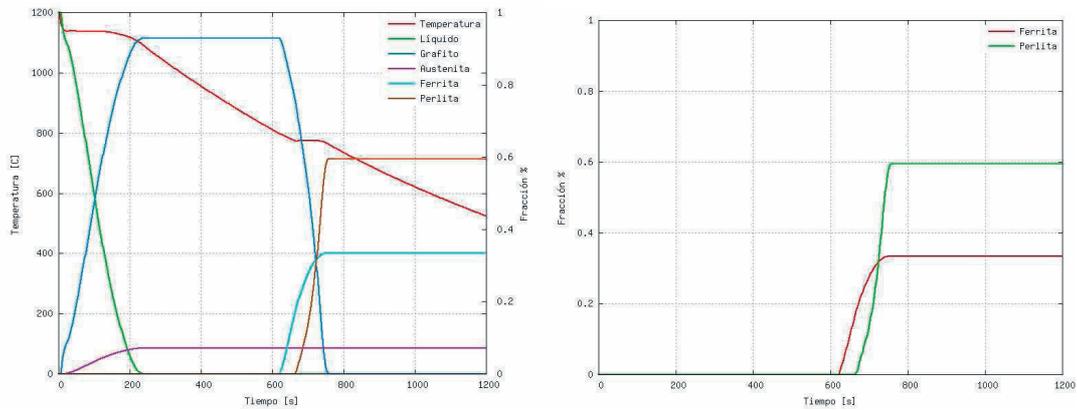


Figura 7: Curva de enfriamiento y fracciones de fase para la nucleación instantánea de la perlita.

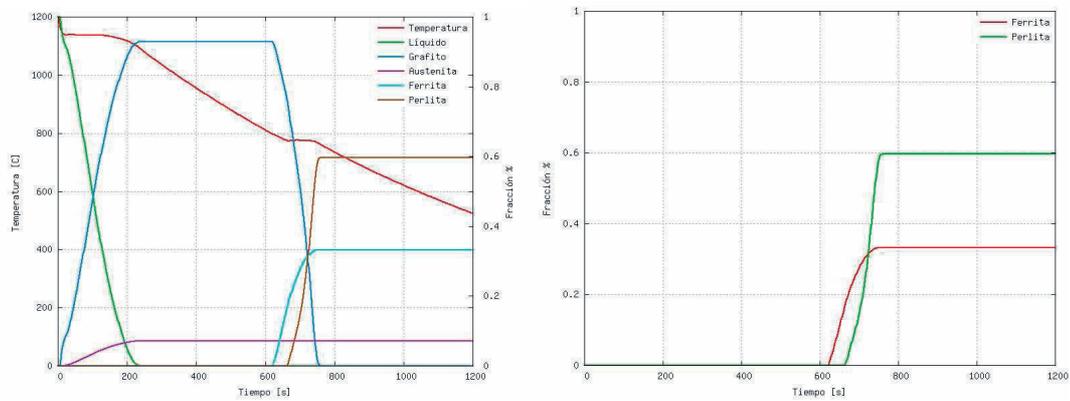


Figura 8: Curva de enfriamiento y fracciones de fase para la nucleación continua función del sobreenfriamiento de la perlita.

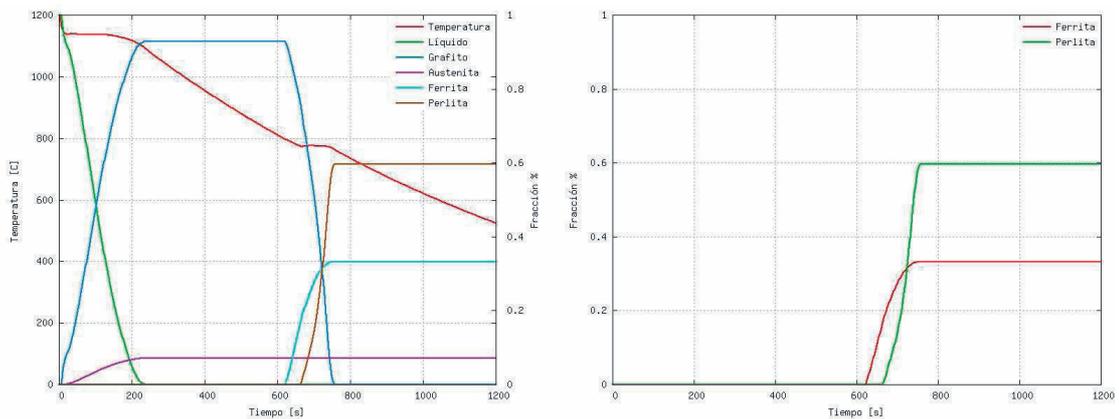


Figura 9: Curva de enfriamiento y fracciones de fase para nucleación continua tipo exponencial de la perlita.

En todos los casos se obtuvieron las mismas fracciones finales y el mismo desarrollo de la transformación eutectoide metaestable, lo cual puede deberse a la distribución de radios de colonias de perlita que se está obteniendo para los modelos de nucleación continuo. Del análisis de los resultados se observó que, con los modelos de nucleación continua de las colonias de perlita, la distribución de radios de las colonias de perlita es reducida, obteniéndose seis radios diferentes para el segundo modelo y ocho para el tercer modelo, esto revela que casi la totalidad de las colonias de perlita nuclean al inicio del proceso metaestable.

Como consecuencia de esto, todas las colonias de perlita obtenidas al final de la transformación son prácticamente del mismo tamaño para las tres leyes de nucleación.

#### 4 CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó un estudio numérico de los cambios de fase eutéctico y eutectoide de una fundición nodular de composición eutéctica, en base al cual se compararon los resultados obtenidos del modelado de los cambios de fase eutectoide estable y metaestable según tres leyes de crecimiento de la ferrita, y tres leyes de nucleación de la perlita, considerando ambos cambios de fase como dos procesos competitivos.

Del análisis de los resultados, se desprende la importancia de lograr una adecuada comprensión de los diferentes fenómenos involucrados en la cinética de las transformaciones de fase para su correcto modelado.

Los resultados obtenidos de los diferentes modelos microestructurales del cambio de fase eutectoide estable, muestran un buen acuerdo con lo reportado por [Lacaze et al. \(1998\)](#) y [Venugopalan \(1990\)](#), aún cuando la variación en la fracción de ferrita registrada debido a la difusión del carbono en la austenita no parece ser despreciable como lo reportan los mismos autores, pudiendo llegar a ser apreciable para velocidades de enfriamiento bajas, donde el cambio de fase eutectoide estable se ve favorecido. La gran diferencia en las fracciones finales de fase calculadas al considerar la reacción interfacial en la interfase ferrita/grafito y al nos considerarla, puede deberse a un valor inadecuado del coeficiente que caracteriza la reacción interfacial  $K^\alpha$ , dado que como dice [Lacaze et al. \(1998\)](#), no es un valor que haya sido firmemente establecido.

Los resultados obtenidos al modificar la ley de nucleación de la perlita fueron iguales para las tres leyes de nucleación, no existiendo diferencia en el tamaño y la cantidad de colonias de perlita al considerar el proceso como instantáneo o continuo; esto puede explicarse por una inadecuada distribución de las colonias de perlita para las leyes de nucleación continuas.

A pesar de que los resultados obtenidos no concuerdan cualitativamente con lo reportado en algunas de las referencias, estas diferencias podrían deberse a la carencia de valores precisos de los coeficientes que intervienen en las fórmulas de nucleación y crecimiento de los cambios de fase eutectoide estable y metaestable. Esto pone de manifiesto la necesidad de desarrollar ensayos que permitan identificar la contribución de la reacción interfacial durante la transformación eutectoide estable, y la distribución de colonias de perlita a los fines de ajustar los coeficientes involucrados.

#### RECONOCIMIENTOS

Este trabajo fue apoyado mediante subsidios otorgados por el Ministerio de Ciencia y Tecnología de la Provincia de Córdoba y el CONICYT (Proyecto Fondecyt 1095195). L. A. Godoy es investigador de CONICET. D. Celentano agradece a CONICYT por el soporte brindado para el desarrollo del presente trabajo.

#### REFERENCIAS

- J. Agren. Computer Simulations of the Austenite/Ferrite Diffusional Transformation in Low-Alloyed Steels, *Acta Metall*, Vol 30, 841, 1982.
- H. T. Angus. Cast Iron: Physical and Engineering Properties, 2<sup>nd</sup> ed., Butterworth's, London, 1976.
- R. Boeri. The Solidification of Ductile Cast Iron. Doctoral Thesis, University of British Columbia, Canadá, 1989.

- A. Catalina, X. Guo, D. Stefanescu, L. Chuzhoy y M. Pershing. Prediction of Room Temperature Microstructure and Mechanical Properties in Gray Iron Casting, AFS Transactions 00-72, 247-457, 2000.
- D. Celentano, E. Oñate y S. Oller. A Temperature-Based Formulation for Finite Element Analysis of Generalized Phase-Change Problems. International Journal for Numerical Methods in Engineering 37, 3441-3465, 1994.
- S. Chang, D. Shanguan y D. Stefanescu. Prediction of Microstructural Evolution in SG Cast Iron from Solidification to Room Temperature, AFS Transactions 91-99, 531-541, 1999.
- P. Dardati. Simulación Micromecánica de la Solidificación de la Fundición Dúctil. Tesis Doctoral, Universidad Nacional de Córdoba, 2005.
- P. Dardati, L. Godoy y D. Celentano. Microstructural simulation of solidification process of spheroidal-graphite cast iron. Journal of Applied Mechanics, Vol. 73, nº 6, 977-983, 2006.
- X. Guo y D. Stefanescu. Solid Phase Transformation in Ductile Iron- A Benchmark for Computational Simulation of Microstructure, AFS Transactions 97-81, 533-543, 1997.
- M. Hillert. The Formation of Pearlite, Trans. AIME 209, 170, 1957.
- J. Lacaze and V. Gerval. Modelling of the Eutectoid Reaction in Spheroidal Graphite Fe-C-Si Alloys. ISIJ International, Vol 38, No. 7, 714-722, 1998.
- G. Rivera, R. Boeri y J. Sikora. Influence of the Solidification Microstructure on the Mechanical Properties of Ductile Iron. Int. J. Cast Metals Res., Vol. 11 (5), 267-272, 1999.
- J. Sikora, R. Boeri y G. Rivera. Characteristics of Austenite in Ductile iron: its Influence on the Microstructure and Properties. Proceedings of the International Conference on the Science of Casting and Solidification, Rumania, 321-329, 2001.
- Thevoz Ph, J. L. Desbiolles, M. Rappaz. Modelling of Equiaxed Microstructure Formation in Castings. Metallurgical Transactions A, Vol. 20A, 311, 1989.
- M. R. Varma, R. Sasikumar, S. G. Pillai and P.K. Nair. Cellular Automaton Simulation of Microstructure Evolution During Austenite Decomposition under Continuous Cooling Condition. Bull. Mater. Sci., Vol. 24, 305-312, 2001.
- D. Venugopalan. A Kinetic Model of the  $\gamma \rightarrow \alpha + \text{Gr}$  Eutectoid Transformation in Spheroidal Graphite Cast Irons, Metallurgical Transactions A, Vol. 21A, 913-918, 1990.
- M. Wessén and I. L. Svensson. Modelling of ferrite Growth in Nodular Cast Iron. Metallurgical and Materials Transactions A, Vol. 27A, 2209-2220, 1996.